



TITLE:

1.非平衡統計力学におけるクラスター近似(北海道大学理学部物理学教室,修士論文題目・アブストラクト(1985年度)その1)

AUTHOR(S):

山下, 明宏

CITATION:

山下, 明宏. 1.非平衡統計力学におけるクラスター近似(北海道大学理学部物理学教室,修士論文題目・アブストラクト(1985年度)その1). 物性研究 1986, 46(4): 568-570

ISSUE DATE:

1986-07-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/92155>

RIGHT:

修士論文題目・アブストラクト (1985 年度) その 1

北海道大学理学部物理学教室

- | | |
|---|---------|
| 1. 非平衡統計力学におけるクラスター近似 | 山 下 明 宏 |
| 2. チオ尿素不整合相の電場効果のX線回折による測定 | 高 橋 功 |
| 3. パイライト型 $\text{Fe}_x\text{Co}_{1-x-y}\text{Ni}_y\text{S}_2$ の磁性 | 大 谷 聡一郎 |
| 4. III-V 族化合物半導体混晶 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ の光学的性質 | 市 森 峰 樹 |
| 5. CeAg の相転移と磁気弾性効果 | 西 岡 孝 |
| 6. 擬一次元電気伝導体 $\text{K}_{0.3}\text{MoO}_3$ の準安定状態 | 福 田 憲 司 |
| 7. ZrTe_3 の異方的超伝導転移 | 中 島 博 臣 |
| 8. 異方的スピングラス ZnMn , CdMn の磁性 | 横 澤 宏 一 |
| 9. $\text{Nb}_{1-x}\text{M}_x\text{Se}_3$ ($\text{M}=\text{Ti}, \text{Ta}$) の電荷密度波状態における
非線形電気伝導 | 脇 本 啓 嗣 |
| 10. ゼオライトに対する He の吸着特性と比熱 | 山 本 康 夫 |
| 11. 高密度近藤系 CeCu_6 の電気抵抗と格子定数の圧力効果 | 柴 田 明 夫 |
| 12. Proton NMR を用いた a-Si iH および $\text{a-Si}_{1-x}\text{C}_x\text{iH}$
の局所構造解析 | 石 村 猛 |

1. 非平衡統計力学におけるクラスター近似

山 下 明 宏

協力系 (cooperative system) で起こる緩和や拡散などの非平衡統計力学の問題を扱う一つの方法として, Kikuchi により, 平衡統計力学のクラスター変分法¹⁾を非平衡に拡張した径路確率法²⁾が与えられた。

クラスター変分法は, 体系の自由度 N に比較して十分小さな自由度 n を持つ部分系に関する情報を使って, 体系全体の状態を近似する方法である。この少数自由度を持つ部分系をクラス

スターとよぶ。近似の粗さは、選択するクラスターの大きさによって決まり、点近似、対近似、三角近似・・・と近似の精度が上がってゆく。平衡統計力学の場合には、状態変数と呼ばれる時間に対する一点確率変数を仮定し、体系全体の状態分布関数を求める。そして、その状態分布関数の最大値として熱平衡が決定される。これは、熱力学でよく知られている最小自由エネルギーの原理と等価である。

一方、非平衡の径路確率法においては、クラスターに関して時間の一点確率変数のみならず時刻 t と $t + \Delta t$ をつなぐ二点確率変数を使って体系全体の遷移確率を表現する。この遷移確率を径路確率関数と呼ぶ。平衡統計力学の熱平衡が状態分布関数を最大にする状態変数によって与えられるのに対して、非平衡の場合には体系の平均運動が径路確率関数を最大にする二点確率変数で決定される。クラスターの二点確率変数を Δt 間にクラスターが通過する径路とみなすことができるのでこの方法を径路確率法とよぶ。

径路確率法は、これまで Ising 系の非線形緩和、金属中の空孔による原子拡散、超イオン伝導、結晶成長、合金における相分離等、多くの問題に応用されている。しかし、理論的な基礎については、クラスター変分法の拡張というだけで、あまり調べられておらず、次のような諸点が問題である。

- (1) 体系の、平均運動しか求められず、揺らぎの時間発展を取り扱うことができない。
 - (2) 方法自身が閉じた体系であるため、他の方法との関係が議論できず、非平衡統計力学の方法として理論の位置付けが不明である。
 - (3) 原理的には高次近似が可能ははずであるが、これまでは対近似までしか扱われていない。
- われわれは Ising 模型を例として、径路確率法について、以上の三点を調べた。

結論として、まず、径路確率関数から出発して、マルコフ過程のマスター方程式を導出できることを示した³⁾。このことによって、揺らぎの取り扱いが可能となった。システムサイズ展開法と組み合わせることによって揺らぎの発展方程式を得た。また、マスター方程式の導出によって、同じく Ising 模型に確率過程を用いた動的モデルである Glauber 模型の近似モデル⁴⁾との関係が議論できるようになった。その結果、点および対近似について両者がまったく同等であることが示された。最後に、高次近似として三角近似も取り扱えることがわかった。

参考文献

- 1) R. Kikuchi, Phys. Rev. **81** (1951) 988.
 - 2) R. Kikuchi, Prog. Theor. Phys. **S35** (1966) 1.
 - 3) K. Wada, T. Ishikawa, and A. Yamashita, Phys. Lett. **110A** (1985) 55.
 - 4) C. M. Van Baal, Physica **111A** (1982) 591.
- Y. Saito, and R. Kubo, J. Stat. Phys. **15** (1976) 233.

2. チオ尿素不整合相の電場効果のX線回折による測定

高 橋 功

序 論

チオ尿素は $E_{\text{bias}} = 0$ で -71°C から -104°C の間に不整合相をもつ強誘電体であり、不整合相では結晶中のチオ尿素分子が c 軸方向に、 $7c \sim 9c$ の周期で光学分枝の B_{3u} モードに対応する格子変調を起こしていることが明らかにされた¹⁾。重水化チオ尿素に E_{bias} を印加することにより、8倍、9倍の整合相が出現し、さらに高電場では幾つかの臨界点が存在することが発見された²⁾。今回はチオ尿素 $\text{SC}(\text{NH}_2)_2$ の結晶に E_{bias} を加え、X線回折の実験を行ない、重水化チオ尿素にみられる様な諸特徴がチオ尿素にも存在するかどうかを調査し、さらに微視的な結晶構造の電場、温度による変化が、巨視的なオーダーパラメーター P にどの様に関係づけられるのかを、最も簡単な自由エネルギー²⁾ を用いて考察した。

実 験

プリセッション写真、四軸型回折計を用いて定性的、定量的な測定を行なった。高電場下での測定のため絶縁には特に注意した。四軸型回折計では各温度、電場で格子定数を測定し、(500)、(403)の主反射と衛星反射の積分強度と位置を E_{bias} をパラメーターにして温度を上昇させながら測定した。

結 果

図2に 30 kV/cm での(500)、(403)の積分強度を示した。図2では衛星反射は現われず、主反射は -90°C 付近で温度に対する勾配が変化し、 -90°C 以上でも存在する。図3は $E = 14\text{ kV/cm}$ での積分強度のグラフであり、 $E = 0$ では不整合中では測定されなかった主反射が $E \neq 0$ で存在している。図4、5は $E = 0$ 、 7 kV/cm での(500)衛星反射の位置から計算さ